

表面效应对铁(100)间隙型位错环的影响

梁晋洁 高宁 李玉红

Surface effect on $\langle 100 \rangle$ interstitial dislocation loop in iron

Liang Jin-Jie Gao Ning Li Yu-Hong

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 69, 036101 (2020) DOI: 10.7498/aps.69.20191379

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.7498/aps.69.20191379>

当期内容 View table of contents: <http://wulixb.iphy.ac.cn>

您可能感兴趣的其他文章

Articles you may be interested in

石墨烯表面的特征水分子排布及其湿润透明特性的分子动力学模拟

Molecular dynamics simulation of characteristic water molecular arrangement on graphene surface and wetting transparency of graphene

物理学报. 2019, 68(8): 086801 <https://doi.org/10.7498/aps.68.20182307>

钨中不同构型的双自间隙原子扩散行为研究

Diffusion behavior of di-interstitials with different configurations in tungsten

物理学报. 2019, 68(12): 126701 <https://doi.org/10.7498/aps.68.20190310>

分子动力学模拟钠硼硅酸盐玻璃电子辐照诱导的结构演化效应

Structure evolution of electron irradiated borosilicate glass simulated by molecular dynamics

物理学报. 2017, 66(10): 106102 <https://doi.org/10.7498/aps.66.106102>

高应变率下温度对单晶铁中孔洞成核与生长影响的分子动力学研究

Molecular dynamics simulation of effect of temperature on void nucleation and growth of single crystal iron at a high strain rate

物理学报. 2019, 68(24): 246102 <https://doi.org/10.7498/aps.68.20190920>

温度对小角度对称倾斜晶界位错运动影响的晶体相场模拟

Phase field crystal simulation of the effect of temperature on low-angle symmetric tilt grain boundary dislocation motion

物理学报. 2019, 68(17): 170504 <https://doi.org/10.7498/aps.68.20190051>

气体-表面相互作用的分子动力学模拟研究

Molecular dynamics simulations on scattering of Ar molecules on smooth and rough surfaces

物理学报. 2018, 67(22): 223401 <https://doi.org/10.7498/aps.67.20181608>

表面效应对铁 $\langle 100 \rangle$ 间隙型位错环的影响*梁晋洁¹⁾²⁾ 高宁²⁾³⁾ 李玉红^{1)†}

1) (兰州大学核科学与技术学院, 兰州 730000)

2) (中国科学院近代物理研究所, 兰州 730000)

3) (中国科学院大学核科学与技术学院, 北京 100049)

(2019年9月10日收到; 2019年11月15日收到修改稿)

在材料辐照损伤过程中, 间隙型位错环的形成及动力学行为严重影响材料在辐照条件下的服役行为. 在常用的以体心立方铁为基的合金材料中, $1/2\langle 111 \rangle$ 和 $\langle 100 \rangle$ 是两种主要的位错环, 其对辐照损伤的影响一直都是核材料领域研究的热点之一. 在之前的研究中, 人们对 $\{111\}$ 面与单个 $1/2\langle 111 \rangle$ 位错环的相互作用进行了深入研究, 发现表面对位错环性质确实有重要的影响. 采用分子动力学方法, 在原子尺度详细研究了另一个重要的表面铁 $\{100\}$ 面对 $\langle 100 \rangle$ 间隙型位错环动力学过程的影响. 模拟发现位错环伯格矢量与表面法线方向的关系、距表面的深度、位错环之间的相互作用以及温度等, 都对位错环与表面的相互作用产生重要影响, 其中, 表面作用下的伯格矢量的演化以及 $\langle 100 \rangle$ 位错环在此过程中的一维运动首次被发现. 基于这些模拟结果, 就 $\langle 100 \rangle$ 位错环对表面辐照损伤结构的影响进行详细地研究, 给出 $\langle 100 \rangle$ 位错环对表面凹凸结构的贡献, 这些结果为理解辐照过程中材料表面的演化提供一种可能的解释.

关键词: 辐照损伤, 位错环, 分子动力学模拟, 表面效应

PACS: 61.80.-x, 61.72.Nn, 02.70.Ns, 68.35.-p

DOI: 10.7498/aps.69.20191379

1 引言

载能粒子与物质相互作用中, 当粒子传递给材料中的原子能量超过其离位阈能时, 原子会离开其原来的晶格点阵位置, 形成间隙子同时留下空位缺陷, 在实际辐照环境中, 大量的载能粒子与物质相互作用会形成过饱和的间隙子和空位, 它们或者发生湮灭, 或者被其他缺陷捕获, 或者同类型缺陷之间相互作用, 形成团簇等缺陷. 间隙子团簇主要形成间隙型位错环, 其伯格矢量不在惯习面内, 因此, 其性质与常见的剪切位错环不同; 而空位的团簇, 可以形成空洞、空位型位错环和堆垛层错等. 除此之外, 辐照还会诱发沉积相等缺陷, 造成辐照

损伤, 严重影响材料的服役性能, 其中位错环是辐照损伤的主要缺陷之一. 目前核裂变、核聚变以及加速器驱动核废料嬗变系统均以体心立方 (BCC) 铁 (Fe) 基合金作为结构材料, 因此, 研究 Fe 中的辐照损伤缺陷对于核能用结构材料的选择具有重要意义.

Fe 中常见的间隙型位错环按照其伯格矢量的不同, 主要有两种 $1/2\langle 111 \rangle$ 和 $\langle 100 \rangle$ ^[1,2], 理论上, Fe 中 $1/2\langle 111 \rangle$ 位错环在低温时稳定, 高温时以 $\langle 100 \rangle$ 位错环为主^[3]. 在经过辐照后的 Fe 薄膜中, 温度高于 400 °C 时, 以 $\langle 100 \rangle$ 位错环为主^[4-6]. 然而, 室温下 Fe 样品透射电镜观察结果显示, 存在 $1/2\langle 111 \rangle$ 和 $\langle 100 \rangle$ 混合态^[2,7], 温度升高到 300 °C 时, 位错环将自发地从 $1/2\langle 111 \rangle$ 转变为 $\langle 100 \rangle$ 伯格矢量

* 科技部国家磁约束核聚变能发展研究专项项目 (批准号: 2018YFE0308101)、国家自然科学基金 (批准号: 11675230, 11775102) 和中国科学院青年创新促进会资助的课题.

† 通信作者. E-mail: liyuhong@lzu.edu.cn

量^[8]. 对于位错环的研究, 万发荣研究组^[9-12]做了细致深入的工作, 他们用透射电子显微镜表征了不同位错环的微观结构并阐述了对应的演化过程, 并详细研究不同温度、合金元素及氢氦存在时对位错环结构及性质的影响. 除了位错环本身结构和性质外, 在 BCC 金属中, 位错环与外部应力场的相互作用^[13]一直是研究热点, 如位错环在拉压应力场下的演化过程^[14], 应力场下的有氦泡挤出位错环形成过程^[15], 界面应力场对位错环形成的影响^[16]以及由双氦泡形成的应力场对位错环演化的影响^[17]等, 这些均表明位错环的形成和演化受到应力场的影响. 除了上述可能的应力场之外, 当表面存在时, 由于表面效应/应力的影响, 棱柱位错环容易被自由表面所吸收^[18]. Terentyev 等^[19]的研究表明: $\langle 100 \rangle$ 位错环的迁移能高于 $1/2 \langle 111 \rangle$ 环, 所以 $\langle 100 \rangle$ 位错环更稳定. 分子动力学模拟同样表明, $1/2 \langle 111 \rangle$ 的棱柱状位错环的迁移势垒低于 0.1 eV, 具有较强的扩散性, 可以沿着伯格斯矢量方向快速的做一维扩散运动^[20,21]. 这些研究表明 $1/2 \langle 111 \rangle$ 较 $\langle 100 \rangle$ 位错环更容易与自由表面发生相互作用. Fikar 等^[22-24]对 $1/2 \langle 111 \rangle$ 与自由表面的相互作用已经做了较为系统的研究, 并对 $\langle 100 \rangle$ 和 $1/2 \langle 111 \rangle$ 位错环能量与深度的关系也做了研究, 但目前尚无研究自由表面是如何影响 Fe 中 $\langle 100 \rangle$ 位错环移动的, 考虑到 $\langle 100 \rangle$ 位错环与 $1/2 \langle 111 \rangle$ 位错环的不同, 同样需要开展相应的研究揭示此种位错环与表面的相互作用及对辐照损伤性能的影响, 因此, 本文利用分子动力学方法, 研究单晶 Fe 中的 $\langle 100 \rangle$ 位错

环与自由表面在原子尺度上的相互作用过程.

2 计算方法

2.1 计算模型

根据本文的研究目的, 计算模型主要包含表面及表面下间隙型位错环. 位错环为间隙型位错环, 伯格斯矢量为 $\langle 100 \rangle$, 惯习面为 $\{100\}$, 初始状态设定为伯格斯矢量垂直于惯习面, 位错环半径为 1 nm. 根据伯格斯矢量的方向以及表面对位错环影响的大小, 选择 $\{100\}$ 表面为主要与 $\langle 100 \rangle$ 位错环相互作用并能揭示表面效应的微观缺陷结构; 在模型的构建中, BCC Fe 基体大小定义为 $20 \text{ nm} \times 17.1 \text{ nm} \times 17.1 \text{ nm}$, 厚度为 20 nm, 为更清晰地反映表面与位错环的相互作用, 上下两个表面设定为真空自由表面. 因此, 根据位错环伯格斯矢量与表面法线的关系, 建立的计算模型主要包括伯格斯矢量与表面法线平行 (图 1(a)) 和垂直 (图 1(b)) 两种情况; 根据是否有不少于两个具有相互作用的位错环以影响位错环与表面的相互作用, 计算模型分为单个位错环与表面的相互作用和两个不同伯格斯矢量取向的位错环与表面相互作用的微观结构 (图 1(c)). 除了考虑伯格斯矢量方向和位错环数目的影响, 也对不同深度的位错环与表面相互作用过程进行了模拟, 具体的深度距离 (d) 定义如下: 对于伯格斯矢量与表面法线平行的结构, 位错环与表面的距离 d 定义为位错环所在的平面与表面的距离; 对于伯格斯矢量与表面法线垂直的结构, 距离

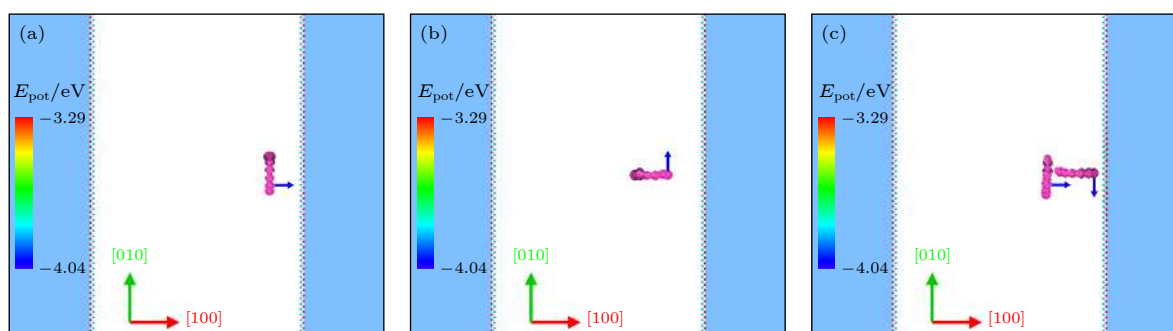


图 1 $\langle 100 \rangle$ 间隙型位错环与表面相互作用计算模型示意图 (a) 和 (b) 单个位错环与表面的相互作用模型, 其中位错环伯格斯矢量分别平行 (a) 和垂直 (b) 于表面法线方向; (c) 两个不同的具有相互作用的伯格斯矢量的 $\langle 100 \rangle$ 位错环与表面相互作用的微观模型; 图中位错环和表面原子的颜色根据其势能 E_{pot} 大小确定, 如图中的能量颜色棒表示, 在表面之外为真空层, 以模拟表面与位错环的相互作用过程

Fig. 1. Schematic of interaction between $\langle 100 \rangle$ loop(s) with $\{100\}$ surface: (a) and (b) Interaction between a single $\langle 100 \rangle$ loop with surface with Burgers vector parallel (a) or perpendicular (b) to the normal line of surface; (c) interaction between two interacting $\langle 100 \rangle$ loops and $\{100\}$ surface. The atoms in loops and surface are colored by their potential energies E_{pot} as marked by the color bar in the Fig. 1.

参数 d 定义为位错环靠近表面最近的结构单元到表面的距离. 因此, 这两种距离的定义本质上都是定义为位错环与表面开始相互作用的深度, 考虑到原子尺度的模拟, d 主要取值为 2 nm 和 4 nm. 这些模型的建立, 可以让本文研究接近实际情况的表面相互作用过程.

2.2 原子尺度模拟方法

本文原子尺度计算主要应用分子动力学方法完成, 其核心算法在于求解基于牛顿运动定律的粒子运动方程:

$$m_i \frac{dv_i}{dt} = m_i a_i(t) = F_i(t) = -\nabla_i U, \quad (1)$$

$$v_i(t) = \frac{dr_i}{dt}, \quad (2)$$

其中, $F_i(t)$ 为粒子 i 所受的力; m_i 为粒子 i 的质量; $a_i(t)$ 为粒子 i 的加速度; U 为势能函数, 其梯度负值为粒子所受的力; v_i 为粒子 i 的速度; r_i 为粒子 i 的位置矢量.

在计算过程中, 对建立的模型采用三维周期性边界条件, 首先对建立的包含表面及位错环的计算胞进行分子静力学弛豫, 使系统达到局部能量最小态, 也就是表面及位错环在 0 K 条件下达到位置平衡, 这些计算都是通过分子静力学方法完成, 在此基础上, 以分子静力学得到的结构进行分子动力学模拟. 根据研究目的, 在分子动力学模拟过程中,

时间步长设定为 1 fs (即 10^{-15} s), 模拟温度为 300, 450, 600, 750, 950, 1200 K, 系综为保持粒子数、体积和温度为常数的 NVT 系综. 需要注意的是, 这些模拟针对的是形成后的缺陷与表面的相互作用, 对应的是辐照后缺陷在给定温度下的动力学过程, 因此, 设定的温度为辐照后的退火温度. 根据实际动力学过程, 如果在给定的温度下, 位错环与表面相互作用后被表面吸收, 则无需再进行后续更高温度的模拟; 对于每一个温度点, 模拟的总时间为 5 ns (5×10^{-9} s), 在弛豫过程中, 采用 Ovito 的 DXA 方法^[25] 对系统中的位错信息进行分析表征, 并对表面形貌做相应的表征. 在模拟过程中, 采用 Ackland-2004 Fe 势函数^[26] 描述原子之间的相互作用.

3 计算模拟结果与讨论

3.1 单个位错环与表面的相互作用

3.1.1 伯格矢量方向的影响

对于相同深度的位错环, 例如 $d = 2$ nm 系统、模拟温度为 300 K 的条件下, 当 $\langle 100 \rangle$ 位错环伯格矢量平行于表面法线方向时, 随着模拟时间的增加, 在原子热涨落过程中, $\langle 100 \rangle$ 位错环的惯习面由平行于系统表面开始逐渐发生变化, 当时间达到 10 ps 后 (图 2(a)), 位错环惯习面开始偏转, 同

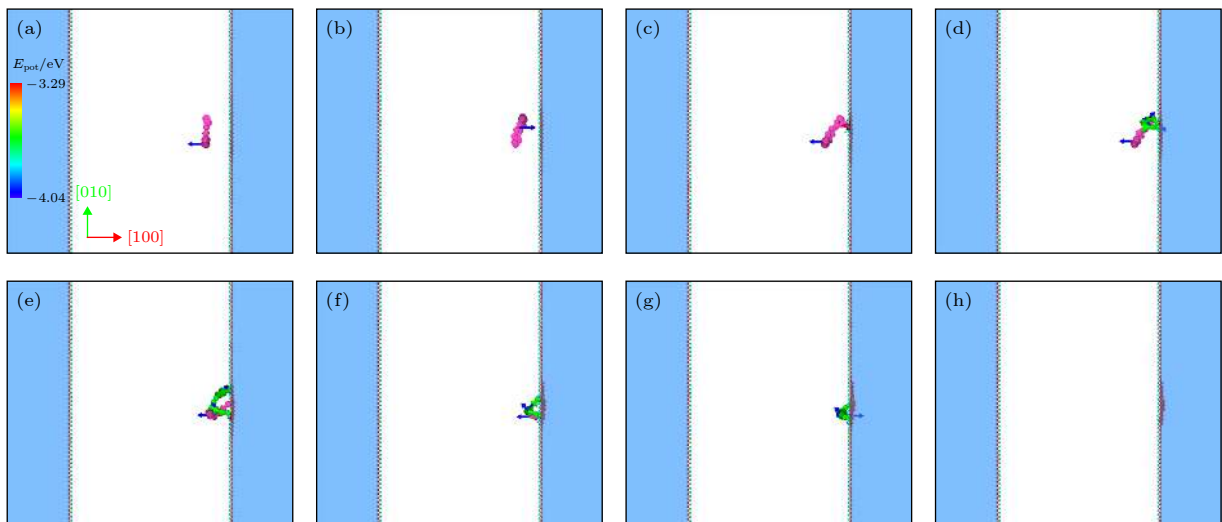


图 2 $\langle 100 \rangle$ 位错环伯格矢量平行于表面法线方向, 300 K 时位错环的演化过程 (a)—(c) 位错环向表面运动过程示意图; (d)—(g) 位错环与表面发生反应过程; (h) 位错环最终被表面吸收后的状态

Fig. 2. Evolution of a $\langle 100 \rangle$ dislocation loop at 300 K with its Burgers vector along the normal direction of surface of $\{100\}$. The motion processes of loop are shown in panel (a) to (c) before its interaction with surface, which are shown in panel (d) to (g). Panel (h) is the final state after the absorption of loop by surface.

时向表面方向缓慢移动; 当模拟时间达 26 ps 时 (图 2(b)), 位错环偏转更加显著, 经过对惯习面原子结构分析, 可以发现惯习面已经发生变化, 由 (100) 开始向 (110) 转变; 经过位错环惯习面的旋转, 位错环质心沿着伯格斯矢量方向运动, 也就是 $\langle 100 \rangle$ 位错环继续向表面偏移, 在此状态下, 位错环与表面的相互作用导致系统表面形貌开始发生微小变化; 经过 223.8 ps 后 (图 2(c)), 位错环一端到达表面; 在与表面直接发生反应后 (图 2(d)), 位错环部分单元伯格斯矢量由 $\langle 100 \rangle$ 逐渐分解为 3 个 $1/2 \langle 111 \rangle$ 位错段, 因此, 表面与 $\langle 100 \rangle$ 位错环的相互作用, 导致在靠近表面的局部区域发生严重的塑性形变, 形成位错环部分分解; 随着表面与 $\langle 100 \rangle$ 位错环的相互作用的加深, 更多的 $\langle 100 \rangle$ 位错环单元在表面作用下发生位错分解 (图 2(e)), 形成 $\langle 100 \rangle$ 和 $1/2 \langle 111 \rangle$ 位错线共存的位错网络, 彼此相互作用; 随着模拟时间的增加 (图 2(f)—(h)), $\langle 100 \rangle$ 片段逐渐减少, $1/2 \langle 111 \rangle$ 片段占比越来越多, 最后全部转变为 $1/2 \langle 111 \rangle$ 位错线逸出表面, 导致逸出处的表面形貌发生显著形变, 凹凸不平.

当 $\langle 100 \rangle$ 位错环伯格斯矢量垂直于表面法线方向时, 模拟温度和深度同样设定为 300 K 和 2 nm, 经过充分弛豫发现当模拟时间达 224 ps 时 (图 3(a)),

位错环的状态几乎没有发生变化; 再经过 653.6 ps 长时间的弛豫 (图 3(b)), $\langle 100 \rangle$ 位错环仅发生微小形变和位移, 并未向表面移动. 相比于位错环伯格斯矢量平行于表面法线的情况, 在相同条件下, $\{100\}$ 表面对垂直于表面的 $\langle 100 \rangle$ 位错环影响比较微弱, 因此, 伯格斯矢量垂直于表面的 $\langle 100 \rangle$ 位错环在给定条件下与其在材料内部 (远离表面) 的动力学行为相同. 当系统模拟温度升高时, $\langle 100 \rangle$ 位错环在更高的热涨落和表面效应影响下, 也会发生各种动力学行为演化, 最终被表面吸收, 具体细节在 3.2 节中详细展开.

经过分析对比这些结果可以发现, 在其他条件相同的情况下, 位错环伯格斯矢量的方向平行或垂直于表面, 对位错环动力学性质及表面结构具有重要的影响. 对于系统表面, 前人研究早已表明表面的形成会产生相应的应力场 [27], 同时, 本文的间隙型位错环伯格斯矢量方向平行于表面法线, 相比于垂直于表面法线方向, 同样存在着较强的应力场分布, 因此, 相对于在材料内部, 由于表面应力的存在, $\langle 100 \rangle$ 位错环在靠近表面和内部两个方向上受到的应力场分布具有非对称性, 这决定了当位错环伯格斯矢量平行于表面法线方向时, 位错环与表面发生的强相互作用导致了如上所述的结果.

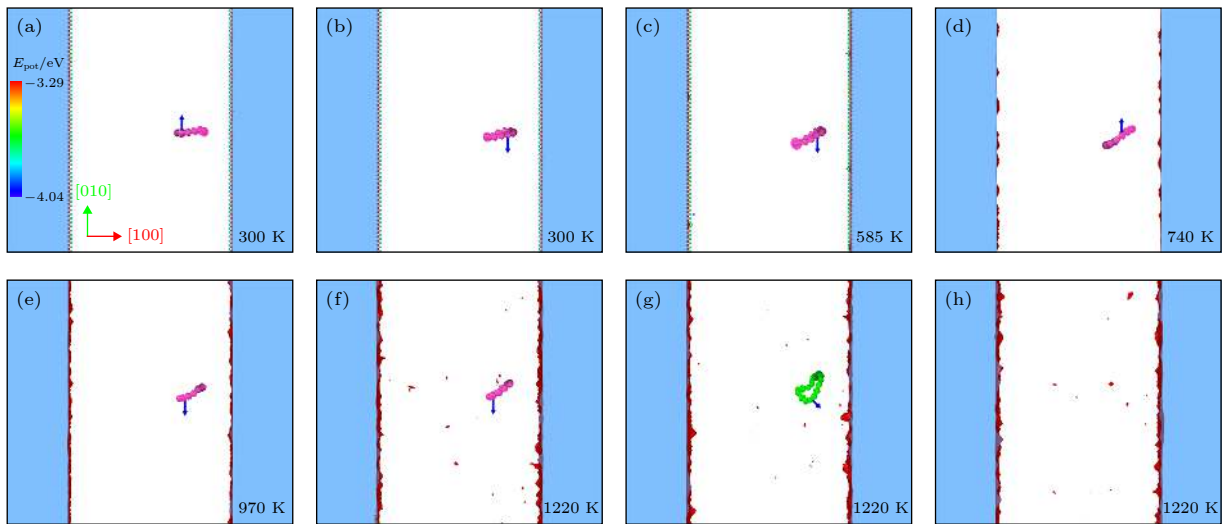


图 3 $\langle 100 \rangle$ 位错环伯格斯矢量垂直于表面法线方向时不同温度下位错环的演化过程 (a) 温度为 300 K, 模拟时间为 224 ps; (b) 温度为 300 K、模拟时间 653.6 ps; (c) 温度为 585 K, 模拟时间为 1731.4 ps; (d) 温度为 740 K, 模拟时间为 523.9 ps; (e) 温度为 970 K, 模拟时间为 822.5 ps; (f) 温度为 1220 K, 模拟时间为 129.9 ps; (g) 温度为 1220 K, 模拟时间为 139.9 ps; (h) 温度为 1220 K, 模拟时间为 149.9 ps

Fig. 3. Evolution of a $\langle 100 \rangle$ dislocation loop at different temperatures with its Burgers vector perpendicular to the normal direction of $\{100\}$ surface. The results simulated at 300 K are shown in (a) and (b) with simulation time up to 224 ps and 653.6 ps, respectively. The results simulated at 585 K, 740 K and 970 K are shown in (c) to (e) with simulation time up to 1731.4 ps, 523.9 ps, 822.5 ps, respectively. The results at 1220 K with simulation time up to 129.9 ps, 139.9 ps, 149.9 ps are shown in (f) to (h), respectively.

对位错环被表面吸收过程中的动力学分析可以发现,除了表面的应力场影响位错环的演化外,没有其他的位错环或位错线与 $\langle 100 \rangle$ 位错环相互作用,而位错环本身的伯格斯矢量由 $\langle 100 \rangle$ 变为 $1/2 \langle 111 \rangle$,因此可以得到:表面效应的存在使得 $\langle 100 \rangle$ 位错环在没有与外部其他位错环或位错线发生位错反应的条件下,发生伯格斯矢量的演化,由高能态向低能态发生跳跃.除了伯格斯矢量的演化外,惯习面也在此过程中发生变化,从 (100) 向 (110) 旋转,正是这种旋转,导致位错环质心在原子尺度的位移,也就是位错环发生一维扩散运动.根据图2,可以得到图4所示的300 K下 $\langle 100 \rangle$ 位错环的质心随着时间演化的运动速率.对于本文的相互作用,图4非常明确地表明了其定向的一维运动.因此,相对于在体材料中或伯格斯矢量垂直于表面法线方向的位错环,本文确认了在给定的条件下(如,位错环靠近表面,伯格斯矢量平行于表面法线方向), $\langle 100 \rangle$ 位错环可以发生沿着伯格斯矢量的一维运动.

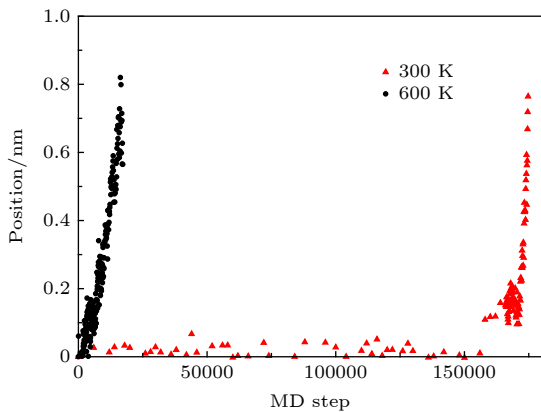


图4 $\langle 100 \rangle$ 位错环伯格斯矢量平行于表面法线方向时,不同温度下位错环的位置演化

Fig. 4. Position of a $\langle 100 \rangle$ dislocation loop with increasing the simulation time. The Burgers vector of loop is parallel to the normal direction of $\{100\}$ surface.

3.1.2 温度的影响

除了300 K模拟温度外,本文对系统也进行了其他温度条件下的弛豫.图4为 $\langle 100 \rangle$ 位错环伯格斯矢量平行于表面法线方向时不同温度下位错环的演化.当位错环伯格斯矢量平行于表面法线,模拟温度为300 K时,位错环惯习面开始发生偏转,大约在160 ps后位错环开始与表面接触,并随后逸出表面;当温度为600 K,位错环迅速沿伯格

斯矢量方向运动,与表面接触发生反应,17 ps左右位错环已经逸出表面.从这些结果可以清晰地看出,温度越高,位错运动翻越的有效势垒降低,导致位错运动加速,使得位错环逸出时间越短.从开始运动到与表面接触及被表面吸收的时间,300 K所需的时间是600 K的9.5倍.显然,温度升高大大加快了位错环向表面的移动速率.同时,需要注意的是,当位错环运动大约0.8 nm后,与表面的相互作用导致了位错环完全被吸收,考虑到位错环最初时的深度,可以推断出表面在其深度1—1.5 nm处,与位错环的反应可以快速发生,造成表面辐照损伤.

当位错环伯格斯矢量垂直于表面法线时,如图3所示,虽然300 K下, $\langle 100 \rangle$ 位错环经过长时间的弛豫,其状态基本维持不变,但当温度升高至600 K时,位错环也开始发生演化,经过1731.4 ps后,位错环的质心位置仍未向表面移动,但是其惯习面由 (010) 逐渐开始偏转;当温度升至750 K时,再经过523.9 ps弛豫,位错环依然未向表面移动,但惯习面偏转角度进一步增大;温度升至1200 K时,位错环性质发生突变,由 $\langle 100 \rangle$ 位错环演变为 $1/2 \langle 111 \rangle$ 位错环,之后快速被表面吸收,形成凹凸不平的表面.

根据上述分析可以发现,温度的升高可以使 $\langle 100 \rangle$ 位错环更快地越过相应的能量势垒,使其惯习面发生旋转、一维运动及位错环伯格斯矢量分解,到位错环整体性质变化和被表面吸收等过程的速率更高,因此,高温辐照条件下,间隙型位错环可能造成更大的表面粗糙度.

3.1.3 位错环深度的影响

相比于位错环深度 $d = 2$ nm条件下的位错环演化,当位错环处于距离表面更深的位置时,其与表面的相互作用也随之发生变化.例如, $\langle 100 \rangle$ 位错环伯格斯矢量平行于表面法线方向时,当初始位置 $d = 4$ nm,温度设定为300 K时,经过125 ps弛豫,位错环始终未有明显变化,再经过1200 ps弛豫,位错环状态与之前保持一致,表明位错环离表面距离4 nm时,位错环比较稳定,不易移动,表面效应不明显;当温度升至600 K,经过195.6 ps到达接近2 nm的初始位置,再经过19 ps已完全逸出表面,动力学过程与上面的计算结果相符合,因此,当温度升高至600 K时,在热涨落与表面效

应耦合作用下, 位错环的动力学状态才会发生改变. 根据之前的研究^[6,8]可以发现只有 $\langle 100 \rangle$ 位错环沿伯格斯矢量方向的应力场与已存在的应力场之间发生的相互作用达到一定的阈值, 或者与其他外场耦合相互作用达到此阈值, 才能使得 $\langle 100 \rangle$ 位错环以一定的概率越过相应的势垒, 导致其动力学过程的演化.

3.2 双位错环与表面的相互作用

在实际辐照实验过程中, 靠近材料表面的位错环, 不仅仅有单个位错的情形, 还有两个或者多个位错环一起形成或到达表面的情形, 为了对后一种情况进行理解, 本文选择两个位错环存在相互作用的情形, 模拟在这种条件下位错环与表面的相互作用过程. 之所以选择两个位错环的情形, 主要考虑当多个位错环存在时, 它们之间的相互作用也是遵循位错反应规律, 与两个位错环的情形相比, 没有影响物理机制的情况发生, 并且两个位错环之间的相互作用, 更容易清晰地表明这种相互作用对位错环与表面之间相互作用的影响.

如第 2 节模型和方法部分的阐述, 两个半径相同且伯格斯矢量相互垂直的位错环, 在未到达表面时, 位错环之间存在相互作用, 主要是由于二者的应力场发生叠加, 导致两者的伯格斯矢量和惯习面均发生相应的演化: 经过分子静力学弛豫后 (图 5(a)—

(c)), 当系统温度升高至 300 K 时, 两个位错环随即开始反应, 与表面平行的位错环性质发生骤变, 由 $\langle 100 \rangle$ 位错环变为 $1/2 \langle 111 \rangle$ 位错环, 并快速与垂直的位错环发生位错反应, 经过 30 ps 的反应过程, 平行位错环与垂直位错环合二为一, 只剩垂直方向的位错环, 但惯习面为 (010); 随着反应时间的增加, 位错环的性质不断发生变化, 部分变为 $1/2 \langle 111 \rangle$, 并逐渐向表面方向移动, 在 300 K 下经过 1180 ps 仍未到达表面; 当温度提高至 600 K, 虽然惯习面在不断发生变化, 但经过 1226.9 ps 同样未到达表面, 直至温度提高到 900 K 时 (图 5(d)—(h)), 才与表面发生直接反应, 历经 128.1 ps 逸出表面, 造成表面的凹凸不平.

对以上结果分析可以清晰地看到, 当存在位错环之间的相互作用时, 其应力场之间的相互叠加, 不仅影响位错环本身的性质, 也影响位错环与表面的相互作用. 尤其值得注意的是, 当两个位错环 [100] 和 [010] 相互反应时, 其反应过程并没有遵循经典的伯格斯矢量守恒法则, 二者发生如下反应: $[100] + [010] \rightarrow [010]$, 形成较大的位错环, 再与表面相互作用, 造成表面更严重的形貌变化, 如第 3.3 节所述.

3.3 位错环对表面形貌演化的影响

当位错环与表面相互作用结束后, 由于位错环

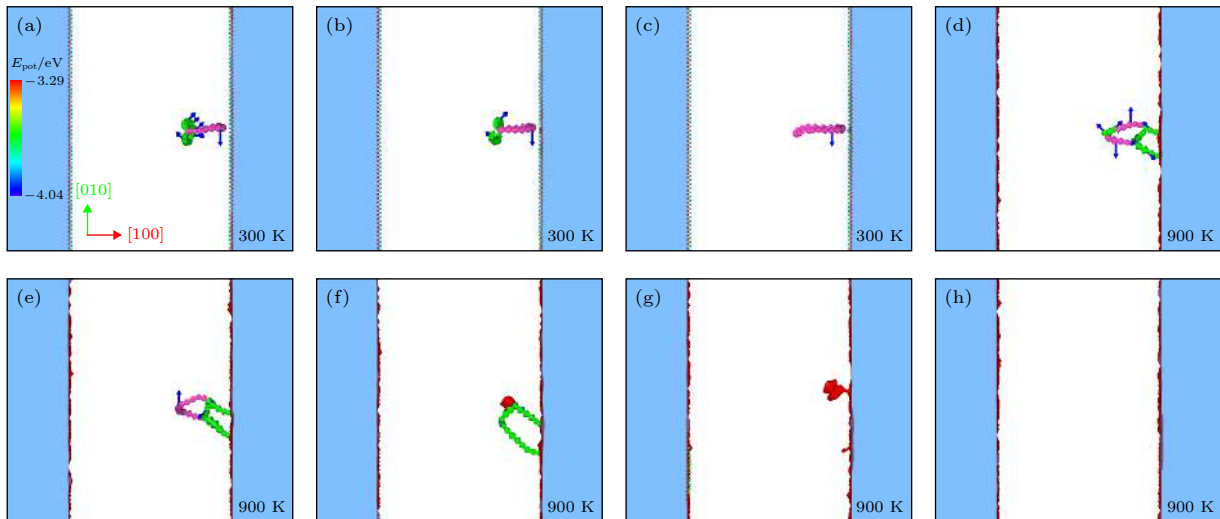


图 5 伯格斯矢量相互垂直的双位错环的演化过程 (a)—(c) 模拟温度为 300 K, 模拟时间分别为 10 ps, 20 ps, 30 ps; (d)—(h) 模拟温度为 900 K, 模拟时间分别为 98.5 ps, 108.4 ps, 118.3 ps, 128.1 ps, 138 ps

Fig. 5. Evolution of two $\langle 100 \rangle$ dislocation loops at 300 K and 900 K with Burgers vector perpendicular to each other. The results obtained at 300 K are shown (a) to (c) with simulation time up to 10 ps, 20 ps, 30 ps, respectively. The results obtained at 900 K are shown (d) to (h) with simulation time up to 98.5 ps, 108.4 ps, 118.3 ps, 128.1 ps, 138 ps, respectively.

被表面捕获吸收,造成在材料内部的物质质量转移,形成原子岛,导致材料表面发生形貌变化,形成凹凸不平的结构.以伯格斯矢量平行于表面法线方向的 $\langle 100 \rangle$ 位错环在300 K下与材料表面相互作用后的结果为例(如图6所示),可以清楚地看到二者反应结束后,在位错环被吸收的位置表面发生形变,形成突起,产生轮廓清晰的原子岛,造成表面形貌的变化.值得注意的是,这种由表面吸收位错环造成的表面形貌的变化,是实验观测到辐照后材料凹凸不平的原因之一,还有其他的因素,如溅射、空洞的形成及惰性气体的起泡等过程,都可能造成表面形貌发生变化,因此,需要根据实际情况对实验结果分析.根据位错环与表面的相互作用过程,也可以推测出在靠近表面的纳米层内,单个自由位错环基本不会存在,它们或者被吸收,或者形成具有较高的迁移能的位错网络而存在于材料内部.对于这种形貌的变化,同样可能会影响材料的服役性能,尤其是位错环定向的吸收造成材料在伯格斯矢量方向长度增加,为辐照蠕变提供了一种可能的途径,因此,在未来抗辐照材料的研发中,这种表面与位错环的相互作用对辐照效应的影响,同样需要考虑在内.

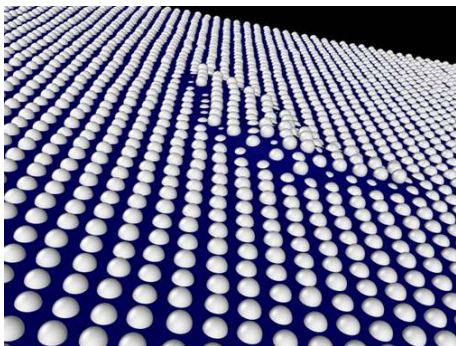


图6 伯格斯矢量平行于表面法线方向的 $\langle 100 \rangle$ 位错环与表面相互作用后的表面形貌

Fig. 6. Surface morphology of $\{100\}$ plane after its absorption of a $\langle 100 \rangle$ dislocation loop with its Burgers vector along the normal direction of $\{100\}$ surface.

4 结 论

利用原子尺度的分子静力学和分子动力学模拟方法,本文研究了辐照形成的 $\langle 100 \rangle$ 间隙型位错环与材料表面的相互作用过程及这种作用对材料表面形貌的影响.研究发现, $\langle 100 \rangle$ 位错环在材料表面附近时,会受到表面的影响,与表面发生相互作

用,位错环的伯格斯矢量方向、距离表面的距离、温度以及是否有其他位错环与之相互作用,都是影响这种作用的因素.其中,伯格斯矢量平行于表面法线方向的位错环易于被表面吸收,而垂直于表面法线的位错环,只有在温度较高时,才能越过能量势垒,被表面吸收;位错环距离表面越近,二者之间的相互作用越强,高温对二者的相互作用也有明显的促进作用.当位错环与表面反应后,表面形貌发生变化,形成凹凸不平的原子岛,是辐照蠕变的贡献因素之一,在未来抗辐照材料研发中需要考虑这些因素对辐照效应的影响.

本研究揭示了原子尺度 $\langle 100 \rangle$ 位错环与表面的相互作用过程,与之前的 $1/2 \langle 111 \rangle$ 位错环与表面的相互作用,既有相同之处,也有新发现,尤其是 $\langle 100 \rangle$ 位错环在表面作用下的定向运动,位错环惯习面旋转和伯格斯矢量从 $\langle 100 \rangle$ 到 $1/2 \langle 111 \rangle$ 的跳跃.以这些研究为基础,在未来工作中,需要更进一步研究多个 $\langle 100 \rangle$ 或 $1/2 \langle 111 \rangle$ 位错环及可能的混合位错与表面的相互作用,以及对表面性能的影响,特别是把这些结果引入到速率理论中,给出位错环与表面相互作用对辐照效应的影响,使计算结果推广到更大的应用尺度.

感谢中国科学院近代物理研究所王志光研究员的讨论.

参考文献

- [1] Masters B C 1965 *Philos. Mag.* **11** 881
- [2] Yao Z, Hernández-Mayoral M, Jenkins M L, Kirk M A 2008 *Philos. Mag.* **88** 2851
- [3] Dudarev S L, Bullough R, Derlet P M 2008 *Phys. Rev. Lett.* **100** 135503
- [4] Hernández-Mayoral M, Yao Z, Jenkins M L, Kirk M A 2008 *Philos. Mag.* **88** 2881
- [5] Jenkins M L, Yao Z, Hernández-Mayoral M, Kirk M A 2009 *J. Nucl. Mater.* **389** 197
- [6] Yao Z, Jenkins M L, Hernández-Mayoral M, Kirk M A 2010 *Philos. Mag.* **90** 4623
- [7] Prokhotseva A, Décamps B, Schäublin R 2013 *J. Nucl. Mater.* **442** S786
- [8] Arakawa K, Hatanaka M, Kuramoto E, Ono K, Mori H 2006 *Phys. Rev. Lett.* **96** 125506
- [9] Huang Y N, Wan F R, Jiao Z J 2011 *Acta Phys. Sin.* **60** 036802 (in Chinese) [黄依娜, 万发荣, 焦治杰 2011 物理学报 **60** 036802]
- [10] Jiang S N, Wan F R, Long Y, Liu C X, Zhan Q, Ohnuki S 2013 *Acta Phys. Sin.* **62** 166801 (in Chinese) [姜少宁, 万发荣, 龙毅, 刘传歆, 詹倩, 大贯惣明 2013 物理学报 **62** 166801]
- [11] Du Y F, Cui L J, Wan F R 2019 *Chinese Journal of Engineering* **41** 1016 (in Chinese) [杜玉峰, 崔丽娟, 万发荣 2019 工程科学学报 **41** 1016]

- [12] Cui L J, Gao J, Du Y F, Zhang G W, Zhang L, Long Y, Yang S W, Zhan Q, Wan F R 2016 *Acta Phys. Sin.* **65** 066102 (in Chinese) [崔丽娟, 高进, 杜玉峰, 张高伟, 张磊, 龙毅, 杨善武, 詹倩, 万发荣 2016 *物理学报* **65** 066102]
- [13] Gao N, Setyawan W, Kurtz Richard J, Wang Z G 2017 *J. Nucl. Mater.* **493** 62
- [14] Gao N, Shen T L, Kurtz R, Wang Z G, Gao F 2017 *Scrip. Mater.* **136** 64
- [15] Cui M H, Gao N, Wang D, Gao X, Wang Z G 2019 *Nucl. Instr. Meth. B*
- [16] Li F B, Ran G, Gao N, Zhao SQ, Li N 2019 *Chin. Phys. B* **28** 085203
- [17] Gao N, Cui M H, Setyawan W, Kurtz R J 2018 *J. Appl. Phys.* **124** 235105
- [18] Bastecka J 1964 *Czechoslovak J. Phys.* **14** 430
- [19] Terentyev D A, Osetsky Y N, Bacon D J 2010 *Acta Mater.* **58** 2477
- [20] Wirth B D, Odette G R, Maroudas D, Lucas G E 2000 *J. Nucl. Mater.* **276** 33
- [21] Osetsky Y N, Bacon D J, Serra A, Singh B N, Golubov S I 2000 *J. Nucl. Mater.* **276** 65
- [22] Fikar J, Groger R 2015 *Acta Mater.* **99** 392
- [23] Fikar J, Groger R, Schaeublin R 2017 *J. Nucl. Mater.* **497** 161
- [24] Fikar J, Groger R, Schaeublin R 2017 *Nucl. Instr. Meth. B* **393** 186
- [25] Stukowski A 2010 *Modell Simul Mater Sci Eng* **18** 015012
- [26] Ackland G J, Mendelev M I, Srolovitz D J, Han S, Barashev A V 2004 *J. Phys.: Condens. Matter* **16** S2629
- [27] Li G W, Huang L G, Yang S H 1992 *Acta Phys. Sin.* **41** 69 (in Chinese) [李国旺, 黄吝根, 杨顺华 1992 *物理学报* **41** 69]

Surface effect on $\langle 100 \rangle$ interstitial dislocation loop in iron*

Liang Jin-Jie¹⁾²⁾ Gao Ning²⁾³⁾ Li Yu-Hong^{1)†}

1) (School of Nuclear Science and Technology, Lanzhou University, Lanzhou 730000, China)

2) (Institute of Modern Physics, Chinese Academy Sciences, Lanzhou 730000, China)

3) (School of Nuclear Science and Technology, University of Chinese Academy of Sciences, Beijing 100049, China)

(Received 10 September 2019; revised manuscript received 15 November 2019)

Abstract

Formation and evolution of interstitial dislocation loop induced by radiation damage in a material are confirmed to seriously affect the performance of the material under irradiation. For example, in body-centered cubic Fe based alloy, $1/2\langle 111 \rangle$ and $\langle 100 \rangle$ are mainly formed during the irradiation, which is related to various degradations of material properties. Thus, the understanding of their effect on radiation damages of material is always one of the hottest topics in nuclear material society. Previous studies have shown the surface effect on $1/2\langle 111 \rangle$ loop through the investigation of the interaction between $1/2\langle 111 \rangle$ loop and $\{111\}$ surface. Considering the difference in property between $1/2\langle 111 \rangle$ loop and $\langle 100 \rangle$ loop, in this work the interaction between a $\langle 100 \rangle$ loop and $\{100\}$ surface is studied in detail through the molecular dynamics method. The simulation results indicate that the factors including Burgers vector of loop, loop-to-surface depth, interaction between pre-existing $\langle 100 \rangle$ loops, and temperature, all seriously affect the interaction between loop and surface. Especially, the present results show for the first time the evolution of Burgers vector of $\langle 100 \rangle$ loop from $\langle 100 \rangle$ to $1/2\langle 111 \rangle$ and its one-dimensional diffusion to surface. According to these results, we also further explore the surface evolution after its interaction with loop. The appearance of atomic island results in the rugged surface morphology. All these results provide a new insight into the radiation damage to the surface of material.

Keywords: radiation damage, dislocation loop, molecular dynamics simulation, surface effect

PACS: 61.80.-x, 61.72.Nn, 02.70.Ns, 68.35.-p

DOI: 10.7498/aps.69.20191379

* Project supported by the National MCF Energy R&D Program of China (Grant No. 2018YFE0308101), the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 11675230, 11775102), and the Youth Innovation Promotion Association, Chinese Academy Sciences.

† Corresponding author. E-mail: liyuhong@lzu.edu.cn